

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Bc. Ondřej Krejčí

Název práce: Teoretické výpočty interakce adsorbátu s orientovanými povrchy Si

Studijní program a obor: Fyzika, Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2013

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: RNDr. Pavel Kocán, Ph.D.

Pracoviště: Katedra fyziky povrchů a plazmatu, MFF UK

Kontaktní e-mail: pavel.kocan@mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Cílem práce bylo pomocí prvoprincipiálních výpočtů vysvětlit experimentálně získaná data ve dvou případech: 1) V případě rekonstrukce Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ určit pravděpodobnou atomární strukturu a 2) v případě molekuly benzenu adsorbované na povrchu Si(111)7x7 určit adsorpční konfigurace. K oběma cílům bylo třeba vyřešit řadu dílčích kroků a testovacích výpočtů, které jsou v práci celkem přehledně a srozumitelně popsány – najít optimální uspořádání, spočítat elektronovou strukturu, simulovat STM mapy, atd.

Výsledky jsou originální, poslouží jako základ dvou publikací, autorův osobní přínos je značný. Pro řešení problematiky bylo třeba se seznámit s náročnou problematikou DFT výpočtů, a cíle by pravděpodobně nebyly dosaženy, kdyby se řešitel nezačal výpočty zabývat už v rámci studentského projektu a bc. práce. Diplomová práce je dle mého názoru na slušné vědecké úrovni, formální nedostatky jsem nezaznamenal, jen po jazykové stránce je práce vzhledem k volbě anglického jazyka poněkud nevyzrálá, což je vyváženo zdařilou a propracovanou grafickou úpravou.

Doporučuji uznat jako práci diplomovou.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Nakolik lze očekávat, že by výsledky získané jinými kódy (např. WASP) byly v kvalitativní i kvantitativní shodě s výsledky práce?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: